

Struktur- und Parameteridentifikation 2

Übung 3 - Modelldiskriminierung von nichtlinearen Modellen

In dieser Übung soll eine Modelldiskriminierung mittels Akaike Information Criterion (AIC) für drei nichtlineare Modelle durchgeführt werden. Daraus werden Modellwahrscheinlichkeiten (Gewichte: w_i) für die Modellkandidaten berechnet, um eine Multimodell-Trajektorienplanung durchzuführen. Es stehen die Modelle M_1 , M_2 und M_3 zur Auswahl.

M_1 :

Das einfache biologische Modell beschreibt das Wachstum der Biomasse X auf einem Substrat S . Die Massenbilanzen liefern

$$\begin{aligned}\dot{m}_X(t) &= \mu(c_S(t)) \cdot m_X(t) \\ \dot{m}_S(t) &= -\frac{1}{Y_{X/S}} \cdot \mu(c_S(t)) \cdot m_X(t) + c_{S, zu} \cdot u(t),\end{aligned}$$

das Reaktionsvolumen $V(t)$ ändert sich dabei mit der Zufütterrate $u(t)$,

$$\dot{V}(t) = u(t).$$

Die Wachstumsrate $\mu(c_S(t))$ soll durch

$$\mu(c_S(t)) = \mu_{\max} \cdot \frac{c_S(t)}{c_S(t) + K_S}$$

beschrieben werden. Gemessen werden die Konzentrationen c_X und c_S ,

$$\begin{aligned}c_X(t) &= \frac{m_X(t)}{V(t)} \\ c_S(t) &= \frac{m_S(t)}{V(t)}.\end{aligned}$$

M_2 :

Im M_2 wird M_1 um einen Erhaltungsterm mit einer einfachen Kinetik erweitert und in die Substratbilanz eingebaut.

$$\begin{aligned}\mu_M(c_S(t)) &= \mu_{M, \max} \cdot c_S(t) \\ \dot{m}_S(t) &= -\frac{1}{Y_{X/S}} \cdot \mu(c_S(t)) \cdot m_X(t) + c_{S, zu} \cdot u(t) - \underbrace{\mu_M(c_S(t)) \cdot m_X(t)}\end{aligned}$$

M_3 :

Im M_3 wird eine Monod-Kinetik für den Erhaltungsterm verwendet.

$$\mu_M(c_S(t)) = \mu_{M, \max} \cdot \frac{c_S(t)}{c_S(t) + K_M}$$

1. Berechnung des AIC für verschiedene Modelle: M_1 , M_2 und M_3

Für die Bearbeitung der Aufgaben steht Ihnen die Datei `spi_2_ueb3.m` zur Verfügung. In der Datei `Messung_Biomodell.mat` ist das Struct `MESS` gespeichert, in dem das dazugehörige **Stellgrößenprofil $u(t)$** , die **Messzeitpunkte t_k** und die **Messdaten $y(t_k)$** von einem **Pulsversuch** hinterlegt sind. Es sollen **zunächst** die **Parameter** der jeweiligen Modelle **identifiziert** werden. M_1 enthält die Parameter μ_{\max} , K_S und $Y_{X/S}$, die bei M_2 um $\mu_{M,\max}$ und bei M_3 um $\mu_{M,\max}$ und K_M erweitert werden. Nach der Identifikation sollen die **AIC** für die jeweiligen Modelle **ermittelt** werden. Die Modelle sind in den m-files `biomodell_1_zdgl.m`, `biomodell_2_zdgl.m` und `biomodell_3_zdgl.m` zu finden.

- x a) Im m-file `aic_ueb3.m` wird das AIC berechnet. Vervollständigen Sie die Gleichung, um das AIC zu berechnen und verwenden Sie dabei die Formeln (7.9) und (6.15) aus dem Skript (Seite.292).
- x b) Wie ist die Empfehlung für das Verhältnis von der Anzahl der Messdaten (N) und der Anzahl der Parameter (m)? Bauen Sie in `aic_ueb3.m` eine if-Schleife, die diese Empfehlung überprüft und die entsprechende Formel für die Berechnung von AIC_c verwendet. Wie lautet diese Formel?
- x c) Im nächsten Schritt sollen mit der Datenbasis aus dem Pulsexperiment die **Parameter der Modellkandidaten geschätzt** werden. Die Parameteranpassung wurde im m-file `spi_2_ueb3.m` bereits implementiert. Dabei wird in einer Schleife auf die unterschiedlichen Modelle zugegriffen, die Parameterschätzung in `guete_pi_MLE.m` durchgeführt und die Ergebnisse dieser Schätzung für die Berechnung des AIC verwendet. In realen Prozessen sind die Modellparameter vor den ersten Versuchen meistens unbekannt. Daher sollen als Startwerte für die Parameterschätzung eine zufällige Auswahl der Parameter zwischen der oberen und unteren Schranke gewählt werden. Nutzen Sie dafür die Matlabfunktion `rand()` und implementieren Sie für \underline{p}_0 :

$$\underline{p}_0 = \underline{pLB} + rand * \underline{pUB}.$$

- x d) Führen Sie die Parameterschätzung durch und berechnen Sie für alle Modellkandidaten das AIC_c . Vergleichen Sie die Ergebnisse.

2. Berechnung der Gewichtung und Anwendung auf eine MMTP

Nun sollen die Akaike-Kriterien für eine Prozessoptimierung (Trajektorienplanung: TP) verwendet werden. Statt der Verwendung eines Modells werden hier **alle Modellkandidaten** in die TP mit einbezogen. Diese Optimierung nennen wir daher Multimodell-Trajektorienplanung (MMTP). Dabei werden die unterschiedlichen **Prozessverläufe der Modellkandidaten durch die Modellwahrscheinlichkeiten** unterschiedlich gewichtet.

- a) **Berechnen Sie** aus den Ergebnissen der Aufgabe 1.d die **Gewichtungen w_i** der einzelnen Modellkandidaten. Verwenden Sie dafür die Formeln (7.10) und (7.11) aus dem Skript.
- b) Im m-file **MMTP.m** wird eine Trajektorienplanung durchgeführt, um die Biomasse zu maximieren. **Definieren Sie das Gütefunktional** und **führen Sie eine Optimierung** über den **fmincon** Befehl **durch**.